



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Simulación y optimización de procesos químicos

Asignatura	Simulación y optimización de procesos químicos			
Código	V12G350V01702			
Titulación	Grado en Ingeniería en Química Industrial			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimstre
	6	OB	4	1c
Lengua	Gallego			
Impartición	Inglés			
Departamento				
Coordinador/a	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Profesorado	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Correo-e	asanchez@uvigo.gal			
Web	<a href="http://http://eqea.uvigo.es">http://http://eqea.uvigo.es</a>			
Descripción general	<p>Materia obligatoria que se imparte en el 7º cuatrimestre de la Licenciatura en Química Industrial, una vez que los alumnos hayan estudiado las asignaturas en las que deben aportar los conocimientos necesarios para abordar esta asignatura, que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Métodos numéricos utilizados en ingeniería química.</li> <li>- Diseño de reactores químicos.</li> <li>- Diseño de equipos para operaciones de separación.</li> <li>- Diseño de equipos de transferencia de calor utilizados en procesos químicos.</li> <li>- Control y seguridad de procesos químicos.</li> </ul> <p>Esta asignatura se imparte en el último año. EL alumno accede a ella después de adquirir y desarrollar habilidades para administrar fácilmente las herramientas informáticas de computación numérica, en cuyo uso continuarán trabajando y profundizando.</p>			

## Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
B3	CG3 Conocimiento en materias básicas y tecnológicas, que les capacite para el aprendizaje de nuevos métodos y teorías, y les dote de versatilidad para adaptarse a nuevas situaciones.
B4	CG4 Capacidad de resolver problemas con iniciativa, toma de decisiones, creatividad, razonamiento crítico y de comunicar y transmitir conocimientos, habilidades y destrezas en el campo de la Ingeniería Industrial en la mención de Química Industrial.
C20	CE20 Capacidad para el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos.
D2	CT2 Resolución de problemas.
D6	CT6 Aplicación de la informática en el ámbito de estudio.
D8	CT8 Toma de decisiones.
D9	CT9 Aplicar conocimientos.
D10	CT10 Aprendizaje y trabajo autónomos.
D17	CT17 Trabajo en equipo.

## Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
------------------------------------	---------------------------------------

Simular un diagrama de flujo de un proceso en régimen estacionario. Conocer los métodos más importantes de simulación de procesos (modular y basado en ecuaciones). Analizar las características estructurales de un proceso químico y determinar el orden de cálculo de las unidades, establecer el flujo de información y seleccionar las variables o corrientes de corte de forma adecuada. Resolver problemas de gran escala modelados por sistemas de ecuaciones algebraicas (sistemas dispersos).	B3 B4	C20	D6 D8 D9 D10 D17
Analizar un proceso, determinar sus grados de libertad y elegir las mejores variables para la optimización. Conocer los conceptos básicos de los algoritmos de optimización determinista más importantes, tanto en variables continuas como discretas.	B3 B4	C20	D6 D9 D17
Modelar adecuadamente un problema de optimización y/o síntesis de procesos y usar las herramientas apropiadas para resolverlo.			
Conocer los conceptos básicos del diseño de procesos a través de simuladores de proceso. La descomposición jerárquica y los fundamentos del diseño basado en superestructuras. Aplicar los conceptos de integración energética para el diseño de redes de intercambio de calor. Saber cómo adquirir y utilizar información bibliográfica y técnica relacionada con este tema. Conocimiento y aplicación de la terminología en inglés utilizada para describir los conceptos correspondientes a este tema.	B3 B4	C20	D2 D6 D9 D10

## Contenidos

### Tema

PARTE 1: SIMULACIÓN	<p>TEMA 1. SIMULACIÓN DE PROCESOS. DIAGRAMAS DE FLUJO. Simulación por ordenador. Tipos de simuladores. Optimización</p> <p>TEMA 2. SIMULACIÓN MODULAR SECUENCIAL. Descomposición del sistema a gran escala. Algoritmos de particionamiento. Descomposición de redes cíclicas máximas.</p> <p>UNIDAD 3. SIMULACIÓN ORIENTADA A ECUACIONES. Método de factorización local (criterio Markowitz). Reordenación "A priori" de matrices dispersas. Fase numérica</p> <p>TEMA 4. GRADOS DE LIBERTAD DE UN DIAGRAMA DE FLUJO. Grados de libertad. Resolución de sistemas de ecuaciones no cuadráticas. Elección de variables de diseño.</p> <p>TEMA 5. PROPIEDADES FÍSICAS NUESTROS SIMULADORES DE PROCESO. Obtención y empleo de las propiedades físicas. Sistemas de cálculo de propiedades físicas.</p> <p>TEMA 6. DISEÑO CONCEPTUAL DE PROCESOS. Síntesis jerárquica. Síntesis basada en programación matemática. Ejemplos de aplicación: síntesis de redes de intercambiadores de calor (método de diseño "Pinch"). Extensiones del método Pinch.</p>
PARTE 2: OPTIMIZACIÓN	<p>TEMA 7. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS. Conceptos básicos de optimización. Optimización no lineal sin restricciones. Conceptos básicos de optimización no lineal con restricciones (igualdad y desigualdad).</p> <p>TEMA 8. MÉTODOS NUMÉRICOS DE OPTIMIZACIÓN. OPCIONAL SIN RESTRICCIONES. Optimización multivariable sin restricciones. Método de gradiente El método de Newton. Métodos de la secante.</p> <p>TEMA 9. PROGRAMACIÓN LINEAL (LP). Definiciones y teoremas básicos de la programación lineal. Solución del problema El algoritmo Simplex. Programación cuadrática</p> <p>TEMA 10. MÉTODOS NUMÉRICOS PARA OPTIMIZAR PROBLEMAS NO LINEALES CON RESTRICCIONES. Métodos de penalización, barreras y métodos lagrangianos. Programación cuadrática sucesiva. Método de gradiente reducido.</p>
ESTUDIO DE CASOS	Ejemplos prácticos de aplicación en industrias químicas y de proceso, utilizando software de simulación y optimización de procesos.

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Actividades introductorias	2	8	10

Lección magistral	6	0	6
Aprendizaje basado en proyectos	12	36	48
Estudio de casos	6	0	6
Simulación	0	18	18
Prácticas con apoyo de las TIC	24	0	24
Resolución de problemas de forma autónoma	0	25	25
Metodologías basadas en investigación	0	10	10
Examen de preguntas de desarrollo	0	3	3

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

Metodologías	Descripción
Actividades introductorias	Presentación y introducción al uso de los programas de simulación y optimización: Matlab, Python-Cantera, COCO SIMULATOR, CHEMPSEP, DWSIM, HYSYS y ASPEN PLUS
Lección magistral	Presentación verbal organizada de temas referidos a los contenidos de la asignatura, impartidos por el profesor con ayudas visuales. Este método didáctico didáctico, implica la comunicación unidireccional del presentador activo a los estudiantes.
Aprendizaje basado en proyectos	Los estudiantes trabajarán en un proyecto durante un período de tiempo prolongado (el *cuatrimestre) que los involucre en la resolución de un problema del mundo real o en la respuesta a una pregunta compleja. Demuestran sus conocimientos y habilidades creando un producto público o una presentación para un público real.
Estudio de casos	Se plantean escenarios basados en situaciones en las que los alumnos observan, analizan, registran, implementan, concluyen, resumen o recomiendan. Los estudios de casos se crean y se utilizan cómo herramienta de análisis y discusión.
Simulación	El alumno tiene que preparar, y documentar, una simulación que implique un proceso original, el avance de un proceso documentado o la optimización de un proceso o planta existente, así como crear una presentación pública de su trabajo.
Prácticas con apoyo de las TIC	Se plantearán simulaciones de parte de procesos o unidades de operación para resolver con las distintas herramientas informáticas que se contemplan en la materia (simuladores de proceso, lenguajes de programación, etc.).
Resolución de problemas de forma autónoma	Se planteará la resolución de problemas de libros tradicionales de la ingeniería química que serán resueltos mediante las herramientas propuestas en la materia, como alternativa a los métodos tradicionales de resolución.
Metodologías basadas en investigación	El alumno deberá documentar el uso de sistemas de busca bibliográfica así como de datos de interés en la web (fuentes de información tutoriales, *etc.).

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Simulación	El alumno propondrá una simulación de un nuevo proceso, mejora de uno existente u optimización de un proceso o planta o, en su caso, deberá adoptar lo asignado por el profesor que será tutor de manera individual o por grupo de cada uno de los simulaciones de la clase.
Aprendizaje basado en proyectos	El docente propondrá pequeños proyectos que el alumno deberá resolver utilizando las herramientas indicadas en clase y presentar para su puntuación según la rúbrica correspondiente que se publicará en la plataforma e-learning. Cada alumno deberá entregar el trabajo realizado en clase al final del mismo. Los proyectos recibirán una puntuación según la rúbrica que se publicará en la plataforma e-learning.
Estudio de casos	Se plantean Escenarios basados &#8203;&#8203;en situaciones en las que los alumnos observan, analizan, registran, implementan, concluyen, resumen o recomiendan. No habrá pruebas.
Prácticas con apoyo de las TIC	En el aula de informática o en el aula de teoría se realizarán simulaciones y resolución de problemas mediante herramientas informáticas que deberán ser entregadas en el mismo día por los alumnos. La calificación se rubricará mediante una rúbrica publicada en la plataforma de aprendizaje electrónico.

### Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Aprendizaje basado en proyectos	Se realizará a lo largo del semestre y se entregará al final de las clases y antes del examen final. La calificación se rubricará con una rúbrica publicada en la plataforma de aprendizaje electrónico.	20

Simulación	El alumno debe realizar y entregar una simulación que contribuya a la evaluación continua y que debe realizarse de forma supervisada a lo largo del semestre. La calificación se rubricará con una rúbrica publicada en la plataforma de aprendizaje electrónico.	20
Resolución de problemas de forma autónoma	Periódicamente el alumno debe entregar resueltos los problemas que se le planteen.	20
Examen de preguntas de desarrollo	Corresponde al examen final de la asignatura que, en el caso de renuncia a la evaluación continua, será el total de la nota. Consiste en uno o más casos, o simulaciones y también se rubricará su corrección.	40

## Otros comentarios sobre la Evaluación

### Alumnos con evaluación continua:

-En la segunda convocatoria se conserva la nota de la evaluación continua.

### Alumnos con renuncia oficial a la evaluación continua:

-El examen final valdrá el 100% de la nota para aquellos alumnos con renuncia a la evaluación continua concedida oficialmente por el centro.

### Compromiso ético:

Se espera que el alumno presente un comportamiento ético adecuado. En el caso de detectar un comportamiento no ético (copia, plagio, utilización de aparatos electrónicos no autorizados, y otros) se considerará que el alumno no reúne los requisitos necesarios para superar la materia. En este caso la calificación global en el presente curso académico será de suspenso (0,0).

## Fuentes de información

### Bibliografía Básica

Kamal I.M. Al-Malah, **Aspen Plus: Chemical Engineering Applications**, 1st Edition, Wiley, 2016

Juma Haydary, **Chemical Process Design and Simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys Applications**, 1st Edition, AIChE, 2019

D.M. Himmelblau, K.B. Bischoff, **Análisis y Simulación de Procesos**, Reverté, 2004

Simant Ranjan Upreti, **PROCESS MODELING AND SIMULATION FOR CHEMICAL ENGINEERS**, 1st Edition, Wiley, 2017

### Bibliografía Complementaria

David. M. Himmelblau, **Optimization of Chemical Processes**, 2nd Edition, McGraw-Hill Higher Education, 2001

## Recomendaciones

### Asignaturas que continúan el temario

Control e instrumentación de procesos químicos/V12G350V01603

Diseño de plantas químicas y de proceso/V12G350V01914

Modelado de procesos biotecnológicos/V12G350V01924

### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Gestión y puesta en servicio de plantas químicas y de proceso/V12G350V01912

Optimización de productos/V12G350V01701

Procesos y productos biotecnológicos/V12G350V01922

Química orgánica industrial/V12G350V01923

### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Ingeniería química I/V12G350V01405

Termodinámica y transmisión de calor/V12G350V01301

Experimentación en química industrial I/V12G350V01505

Experimentación en química industrial II/V12G350V01602

Ingeniería química II/V12G350V01503

Reactores y biotecnología/V12G350V01601

Calor y frío en la industria de proceso/V12G350V01913

Técnicas y gestión medioambientales/V12G350V01925

## Otros comentarios

Los pilares que sustentan esta materia se concretan en el uso de técnicas de cálculo numérico, aplicadas a los contenidos de la ingeniería química: balances de materia y energía, fenómenos de transporte, termodinámica, dinámica de fluidos, termotécnica, operaciones de separación, reactores, control de procesos, etc.).

---